

# 动态光散射混合非负截断奇异值反演

窦震海<sup>1,2</sup> 王雅静<sup>1\*</sup> 申 晋<sup>1</sup> 刘 伟<sup>1</sup> 高珊珊<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> 山东理工大学电气与电子工程学院, 山东 淄博 255049)  
<sup>2</sup> 中国农业大学信息与电气工程学院, 北京 100081)

**摘要** 为了提高动态光散射(DLS)粒径反演精度,考虑到粒径分布(PSD)的非负性及截断奇异值反演(TSVD)法的抗干扰性,比较了信赖域法(Trust)及内点牛顿法(IPN)非负约束的 TSVD 反演的特性,并结合两者特性,提出了一种 Trust 与 IPN 相结合的截断奇异值(Trust-IPN-TSVD)粒径反演方法。该方法继承了 Trust-TSVD 及 IPN-TSVD 方法的优点。通过模拟 200~500 nm 单峰、100~700 nm 双峰分布颗粒 Trust、IPN 及 Trust-IPN 三种 TSVD 方法的反演结果可以看出:相对于 Trust-TSVD, Trust-IPN-TSVD 最多分别可改善单峰、双峰分布颗粒反演 PSD 峰值误差、相对误差为 1.68%、0.2461, 1.41%、0.0587,且它的 PSD 更平滑;相对于 IPN-TSVD, Trust-IPN-TSVD 最多可改善单、双峰分布颗粒反演 PSD 峰值误差、相对误差为 4.52%、3.710, 9.47%、0.4229,且它的 PSD 明显变窄。因此,Trust-IPN-TSVD 法的反演 PSD 具有较高的精度及较好的平滑性,更符合理论分布。最后实测颗粒的反演结果证实了该结论。

**关键词** 测量;动态光散射;粒径反演;截断奇异值分解;信赖域;内点牛顿法

中图分类号 TN911.74 文献标识码 A doi: 10.3788/CJL201340.0608001

## A Hybrid Non-Negative Inversion of Dynamic Light Scattering Based on Truncated Singular Value Decomposition

Dou Zhenhai<sup>1,2</sup> Wang Yajing<sup>1</sup> Shen Jin<sup>1</sup> Liu Wei<sup>1</sup> Gao Shanshan<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> College of Electrical and Electronic Engineering, Shandong University of Technology, Zibo, Shandong 255049, China)  
<sup>2</sup> College of Information and Electrical Engineering, China Agricultural University, Beijing 100081, China)

**Abstract** In order to improve particle size inversion accuracy of the dynamic light scattering (DLS), considering non-negative characteristic of the particle size distribution (PSD) and strong anti-noise characteristic of truncated singular value decomposition (TSVD) method, TSVD inversion methods of the trust-region (Trust) and interior point Newton (IPN) non-negative constraints are compared in this paper. Combining characteristics of two methods, a particle size inversion method based on Trust-IPN and TSVD (Trust-IPN-TSVD) is proposed. This method inherits the advantages of the Trust-TSVD and IPN-TSVD methods. The inversion of Trust-TSVD, IPN-TSVD and Trust-IPN-TSVD method for 200~500 nm unimodal distribution particles and 100~700 nm bimodal distribution particles is simulated. Results show that compared with the Trust-TSVD, for unimodal and bimodal distribution particles, Trust-IPN-TSVD can improve the peak value error and the relative error of inversion PSD by 1.68%, 0.2461 and 1.41%, 0.0587, respectively, and its PSD is smoother. Compared IPN-TSVD, for unimodal and bimodal distribution particles, Trust-IPN-TSVD can improve the peak value error and the relative error of inversion PSD by 4.52%, 3.710 and 9.47%, 0.4229, respectively, and its PSD is significantly narrower. Therefore, the inversion PSD of Trust-IPN-TSVD method has higher accuracy and better smoothness, and is more consistent with the theoretical distribution. Finally, the inversion of experimental particles confirms this conclusion.

**Key words** measurement; dynamic light scattering; particle size inversion; truncated singular value decomposition; trust-region; interior point Newton method

**OCIS codes** 290.3200; 290.3700; 290.5820; 290.5850; 300.6170

收稿日期: 2013-01-08; 收到修改稿日期: 2013-03-02

基金项目: 山东省自然科学基金(ZR2010FM005, ZR2012EEM028)和山东省高等学校科技计划(J12LJ53)资助课题。

作者简介: 窦震海(1970—),男,博士,讲师,主要从事光电检测技术方面的研究。E-mail: douzhenhai1105@126.com

\* 通信联系人。E-mail: wangyajing0725@126.com

# 1 引 言

动态光散射(DLS)技术是一种有效的测量布朗运动颗粒粒径的光学技术<sup>[1~3]</sup>。该技术通过测量悬浮液中布朗运动粒子散射光强的自相关函数,并对其反演来获取颗粒的粒径分布(PSD)信息。但粒径反演问题需要求解第一类 Fredholm 积分方程,该方程是个严重的病态方程。测量数据的微小扰动都会引起解的很大偏差或出现不稳定现象。因此,寻求近似真实的粒径分布成为 DLS 技术的难点。针对该问题,目前已提出了多种反演算法,如累积法<sup>[4]</sup>、CONTIN 法<sup>[5]</sup>、双指数法<sup>[6]</sup>、指数采样法<sup>[7]</sup>、NNLS 法<sup>[8]</sup>、极大似然法<sup>[9]</sup>和神经网络法<sup>[10]</sup>等。然而这些算法都有一定的局限性,普遍存在测量精度不高的问题。因此,反演问题仍然是目前的研究热点。

在反演问题求解中,正则化法是一种有效的方法。对于 DLS 反演,CONTIN 算法就采用 Tikhonov 正则化方法对粒径进行反演。该算法具有一定的抗噪声能力,但它存在程序复杂、先验信息需求量大、多峰分辨能力差等缺点。与 Tikhonov 方法相比,截断奇异值(TSVD)正则化法具有更强的抗噪能力。因此,为了提高反演算法的精度及抗干扰能力,本文采用 TSVD 对粒径进行反演。同时,考虑 PSD 的非负性,在反演算法中对解附加一个非负约束条件,使解限制在一个比较小的范围内,可以进一步提高反演精度<sup>[11]</sup>。非负约束方法有多种,其中,信赖域(Trust)非负约束方法<sup>[12]</sup>是目前工程领域广泛应用的方法。该方法用于 DLS 反演时,求解出的 PSD 误差较小,但经常会出现不平滑的现象<sup>[13]</sup>。内点牛顿法(IPN)<sup>[14]</sup>也是一种非负约束方法,该方法用于 DLS 反演时,具有较好的平滑性,但反演 PSD 偏差较大。本文结合两种方法的特性,将其用于动态光散射 TSVD 反演,并由此提出了一种 Trust 法及 IPN 法相结合的非负约束截断奇异值动态光散射反演方法。该方法具有较高的精度和较强的抗干扰能力。

## 2 动态光散射 TSVD 反演原理

激光器发出的光经透镜聚焦后,照射到样品池内布朗运动的粒子上,光电探测器接收到散射光强信号,光强信号通过相关器进行相关运算并送入计算机,由计算机对相关函数进行反演运算。反演运算的归一化自相关函数为

$$g(\tau) = \int_0^{\infty} G(\Gamma) \exp(-2\Gamma\tau) d\Gamma, \quad \int_0^{\infty} G(\Gamma) d\Gamma = 1, \quad (1)$$

式中  $\Gamma$  为衰减线宽,  $G(\Gamma)$  为衰减线宽分布函数,  $\tau$  为延迟时间。衰减线宽与粒径的关系为

$$\Gamma = Dq^2, \quad q = \frac{4\pi n}{\lambda_0} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad D = \frac{k_B T}{3\pi\eta d}, \quad (2)$$

式中  $q$  为散射波矢量,  $D$  为平移扩散系数,  $\lambda_0$  为激光在真空中的波长,  $\theta$  为散射角,  $n$  为溶液的折射率,  $k_B$  为 Boltzman 常数,  $T$  为绝对温度,  $\eta$  为溶液黏性系数,  $d$  为球型颗粒的直径。

(1)式离散化后可表示为

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad (3)$$

式中  $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{x}$ 、 $\mathbf{b}$  的值分别为  $g(\tau_j)$ 、 $G(\Gamma_i)$ 、 $\exp(-2\Gamma_i\tau_j)$ 。

对(3)式进行求解得  $G(\Gamma_i)$ , 即相应的粒径分布。

对于(3)式,其最小二乘解可表示为<sup>[15]</sup>

$$\min \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 = \mathbf{x}_{LS}. \quad (4)$$

假设矩阵  $\mathbf{A} \in R^{m \times n}$  ( $m \geq n$ ) 的奇异值分解为

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T = \sum_{i=1}^n u_i \sigma_i \mathbf{v}_i^T, \quad (5)$$

式中  $\sigma_i$  为奇异值,  $\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_n > 0$ ,  $\mathbf{v}_i$  为矩阵  $\mathbf{V}$  的列向量,  $\mathbf{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ ,  $\mathbf{U} = (u_1, u_2, \dots, u_n) \in R^{m \times n}$ ,  $\mathbf{V} = (v_1, v_2, \dots, v_n) \in R^{m \times n}$  分别为左、右奇异矩阵。

可考虑  $\mathbf{A}$  的奇异值分解,则  $\mathbf{x}_{LS}$  可表示为

$$\mathbf{x}_{LS} = \sum_{i=1}^n \frac{\langle u_i, \mathbf{b} \rangle}{\sigma_i} \mathbf{v}_i. \quad (6)$$

由于小奇异值对应噪声分量,从(6)式可看出,如果  $\sigma_i$  很小,那么  $\mathbf{x}_{LS}$  将会有很大的偏差。为了减小这种偏差,TSVD 是一种很好的方法,它能够把对扰动起放大作用的小奇异值去掉。基于这种原理,去掉小奇异值后,矩阵  $\mathbf{A}$  可表示为

$$\mathbf{A}_k = \sum_{i=1}^k u_i \sigma_i \mathbf{v}_i^T, \quad (7)$$

式中  $k$  为正则参数,它控制着解稳定度与精度的平衡。

综合(6)式及(7)式,(3)式的求解问题可表示为

$$\min \|\mathbf{A}_k \mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2. \quad (8)$$

选择合适的正则参数,对(8)式进行非负约束求解获得 PSD。L-curve 正则参数选择准则<sup>[16]</sup>是工程中常用的准则,本文采用该准则。

## 3 非负约束 TSVD 反演算法

### 3.1 Trust 非负约束 TSVD 算法(Trust-TSVD)

Trust 法是一种大型非负约束算法,它通过信赖域法解决下面(9)式或(10)式的最小问题:

$$\min_{x>0} \left\{ \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{H} \mathbf{x}; \quad \mathbf{l} < \mathbf{x} < \mathbf{u} \right\}, \quad (9)$$

$$\min_{x>0} \{ \| \mathbf{Ax} - \mathbf{b} \| : \mathbf{l} < \mathbf{x} < \mathbf{u} \}. \quad (10)$$

它们两者的关系为  $\mathbf{H} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ ,  $\mathbf{c} = -\mathbf{A}^T \mathbf{b}$ 。求解原理如下: 设  $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{Hx} + \mathbf{c}$ , 若定义对角矩阵  $\mathbf{D}(\mathbf{x})$ , 它的第  $i$  个对角元素为  $|v_i(\mathbf{x})|^{1/2}$ , 向量  $v_i$  定义为

$$v_i = \begin{cases} x_i - u_i & g_i < 0 \text{ and } u_i < \infty \\ x_i - l_i & g_i \geq 0 \text{ and } l_i > -\infty \\ -1 & g_i < 0 \text{ and } u_i = \infty \\ 1 & g_i \geq 0 \text{ and } l_i = -\infty \end{cases}. \quad (11)$$

那么, (9) 式或 (10) 式的局部极小值为如下非线性系统的解

$$\mathbf{D}^2(\mathbf{x}) \mathbf{g}(\mathbf{x}) = 0. \quad (12)$$

在可行域  $\mathbf{l} < \mathbf{x} < \mathbf{u}$  内, 通过对 (12) 式进行局部极小值求解, 并利用二维子空间分解技术, 可获得 (9) 式或 (10) 式的全局最优解, 具体参看文献 [12]。

### 3.2 IPN 非负约束 TSVD 算法 (IPN-TSVD)

IPN 法<sup>[14]</sup> 通过搜索满足 KKT (Karush-Kuhn-Tucker) 条件的解来求非负约束问题。(10) 式中, 假定  $\mathbf{A}$  是满秩的, 它的解  $x^*$  满足 KKT 条件

$$x^* \geq 0, \quad \mathbf{g}(x^*) \geq 0, \quad \mathbf{g}(x^*)^T x^* = 0, \quad (13)$$

式中  $\mathbf{g}$  是目标函数的梯度。

这样  $x^*$  能够通过寻找公式

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}) \mathbf{g}(\mathbf{x}) = 0 \quad (14)$$

的正解求得:

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}) = \text{diag}[d_1(\mathbf{x}), \dots, d_n(\mathbf{x})], \quad x \geq 0,$$

$$d_i(\mathbf{x}) = \begin{cases} x_i & g_i(\mathbf{x}) \geq 0 \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}.$$

通过相应的变换, 在可行域内采用牛顿迭代法对 (14) 式进行迭代, 可得到 (10) 式的非负解。

为了验证上述两种方法的效果, 分别采用两种方法, 对噪声水平为 0.005 的模拟双峰分布颗粒相关函数进行反演。模拟初始分布为 Johnson's  $S_B$ <sup>[17]</sup> 函数, 相应参数分别为:  $u_1 = 3.4$ ;  $\sigma_1 = 2.1$ ;  $u_2 = -3.2$ ;  $\sigma_2 = 2.8$ ;  $\alpha_{\max} = 900 \text{ nm}$ ;  $\alpha_{\min} = 100 \text{ nm}$ 。模拟实验参数为: 入射光波长 632.8 nm, 分散介质 (水) 折射率 1.331, 散射角  $90^\circ$ , 测量温度  $25^\circ \text{C}$ , 波尔兹曼常数  $1.3807 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ , 水的黏度系数  $0.89 \times 10^{-3} \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-2}$ 。在反演范围  $[1, 1000]$  (单位 nm) 内, 当反演间隔数、反演初值分别为 50 和 0 时, 对上述颗粒进行反演, 反演结果如图 1、2 和表 1 所示。该双峰分布颗粒的理论峰值分别为 200.8 nm, 700.3 nm。

表 1 中, 相对误差为  $\frac{\| \mathbf{x} - \mathbf{x}_{\text{theory}} \|_2}{\| \mathbf{x}_{\text{theory}} \|_2}$ 。

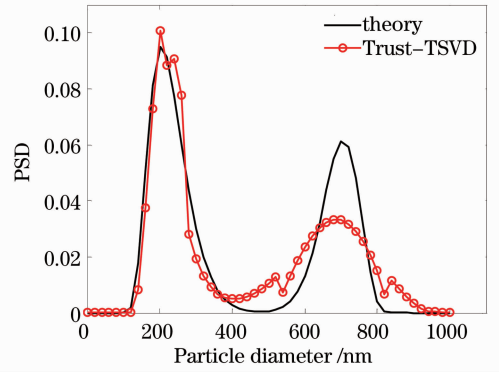


图 1 Trust-TSVD 法的反演粒径分布  
Fig. 1 Inversion PSD of Trust-TSVD

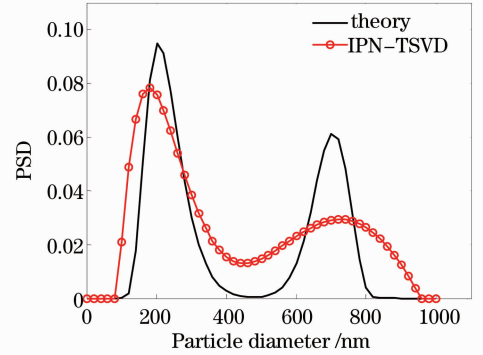


图 2 IPN-TSVD 法的反演粒径分布  
Fig. 2 Inversion PSD of IPN-TSVD

表 1 Trust-TSVD 和 IPN-TSVD 方法的反演数据  
Table 1 Inversion data of Trust-TSVD and IPN-TSVD

Method	Peak value / nm	Peak value error / %	Relative error
Trust-TSVD	200.80, 680.32	0, 2.85	0.2956
IPN-TSVD	180.82, 720.28	9.95, 2.85	0.5371

从图 1 和表 1 能够看出, 采用 Trust 法进行非负约束时, 反演出的 PSD 平滑性较差。但是该方法反演 PSD 的峰值误差、相对误差都比较小, 更接近理论分布, 尤其第一个峰与理论分布吻合很好。当采用 IPN 法进行非负约束时, 从图 2 和表 1 看出, 相对于 Trust-TSVD 方法, IPN-TSVD 方法的反演 PSD 光滑性很好, 但它两个峰与理论分布相差都比较大, 展宽比较严重, 并且反演 PSD 峰值误差、相对误差也比较大。

### 3.3 Trust 与 IPN 相结合的反演算法 (Trust-IPN-TSVD)

对于 DLS 反演, 反演 PSD 应该具有较高的精度、较好的平滑性。从上述分析得出, Trust 非负约束法具有较高的精度, 但平滑性差, 而 IPN 方法有很好的平滑性, 但是精度比较差。因此, 为了得到较

好的反演 PSD, 希望把两者的优点进行结合。为此, 本文将 Trust 和 IPN 方法结合, 构成了一种混合 TSVD 算法 (Trust-IPN-TSVD)。该算法先用 IPN-TSVD 法进行反演得到计算结果, 然后将该计算结果作为初值  $x_0$  用于 Trust-TSVD 法进行反演。这样相当于 Trust-TSVD 法的反演是在最优值附近进行寻优, 比较容易得到较平滑的最优解。

为了验证该方法的反演效果, 分别采用 Trust-TSVD、IPN-TSVD、Trust-IPN-TSVD 三种方法对模拟产生的 200~500 nm 单峰、100~700 nm 双峰

分布颗粒的噪声相关函数进行反演, 噪声水平分别为 0.001, 0.005, 0.01。其中, 单峰颗粒模拟分布函数的参数分别为  $u=0.7; \sigma=1.4; \alpha_{\max}=500 \text{ nm}; \alpha_{\min}=200 \text{ nm}$ 。双峰模拟分布函数的参数分别为  $u_1=3.8; \sigma_1=2.1; u_2=-2.4; \sigma_2=2.0; \alpha_{\max}=700 \text{ nm}; \alpha_{\min}=100 \text{ nm}$ 。模拟实验参数同上。反演中, 单峰、双峰分布颗粒的反演范围分别为 [150, 600], [1, 800] (单位 nm), 两种颗粒的反演间隔数、反演初值均为 100, 0。上述三种方法的颗粒反演结果及数据分别如图 3、4 及表 2、3 所示。

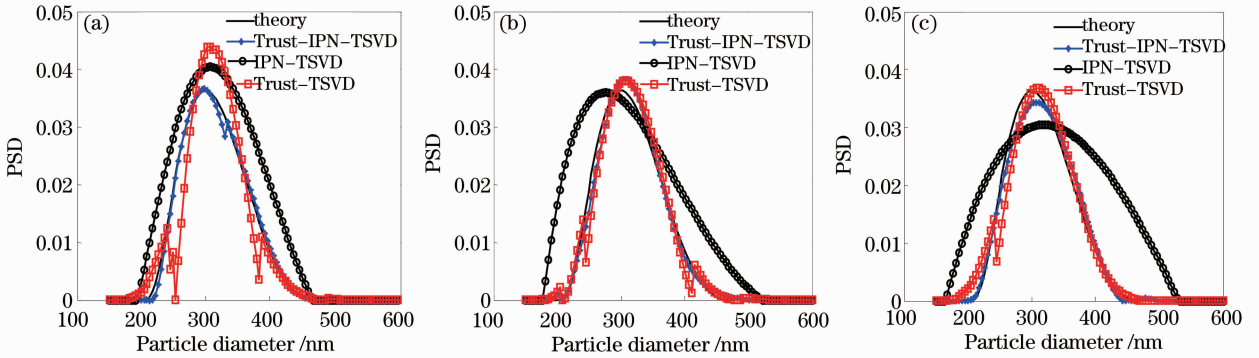


图 3 不同噪声水平下单峰分布颗粒的反演粒径分布。(a) 0.001; (b) 0.005; (c) 0.01

Fig. 3 Inversion PSD of unimodal particles at different noise levels. (a) 0.001; (b) 0.005; (c) 0.01

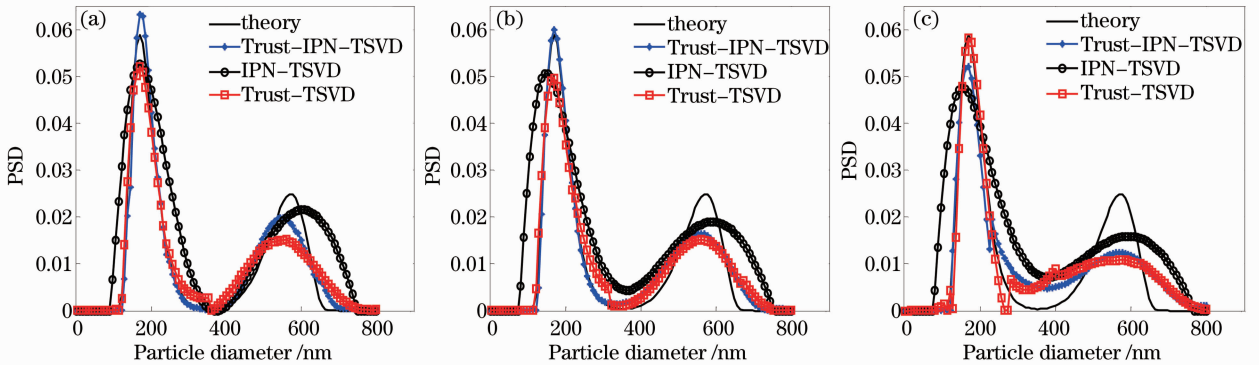


图 4 不同噪声水平下双峰分布颗粒的反演粒径分布。(a) 0.001; (b) 0.005; (c) 0.01

Fig. 4 Inversion PSD of bimodal particles at different noise levels. (a) 0.001; (b) 0.005; (c) 0.01

表 2 不同噪声水平下单峰分布颗粒的反演数据

Table 2 Inversion data of unimodal particles at different noise levels

Noise level	Trust-TSVD			IPN-TSVD			Trust-IPN-TSVD		
	Peak value /nm	Peak value error /%	Relative error	Peak value /nm	Peak value error /%	Relative error	Peak value /nm	Peak value error /%	Relative error
0.001	303.5	1.68	0.2920	307.5	3.02	0.3995	298.5	0	0.0459
0.005	307.5	3.02	0.1367	276.0	7.54	0.5401	307.5	3.02	0.0838
0.01	312.0	4.52	0.1539	316.5	6.03	0.5945	307.5	3.02	0.0826

表 3 不同噪声水平下双峰分布颗粒的反演数据

Table 3 Inversion data of bimodal particles at different noise levels

Noise levels	Trust-TSVD			IPN-TSVD			Trust-IPN-TSVD		
	Peak value /nm	Peak value error /%	Relative error	Peak value /nm	Peak value error /%	Relative error	Peak value /nm	Peak value error /%	Relative error
0.001	168.79	0	0.2169	168.79	0	0.5069	168.79	0	0.1623
	560.30	1.41		600.25	5.62		560.30	1.41	
0.005	168.79	0	0.2278	152.81	9.47	0.5920	168.79	0	0.1691
	560.30	1.41		592.26	4.22		560.30	1.41	
0.01	168.79	0	0.3061	152.81	9.47	0.5899	168.79	0	0.2893
	576.28	1.41		584.27	2.81		568.29	0	

从图 3、4 及表 2、3 可以看出,相对于 Trust-TSVD 法,Trust-IPN-TSVD 法的反演 PSD 峰值误差、相对误差都不同程度地减小,200~500 nm 单峰、100~700 nm 双峰分布颗粒最多可分别改善峰值误差、相对误差为 1.68%、0.2461,1.41%、0.0587,且 Trust-IPN-TSVD 法的反演 PSD 与理论 PSD 吻合更好,它的平滑性具有明显改善。相对于 IPN-TSVD 法,Trust-IPN-TSVD 法的反演 PSD 峰值误差、相对误差都明显地改善了,200~500 nm 单峰、100~700 nm 双峰分布颗粒最多可以分别改善峰值误差、相对误差为 4.52%、3.710,9.47%、0.4229,Trust-IPN-TSVD 法的 PSD 明显变窄,与理论 PSD 吻合更好。从上述分析可以看出,Trust-IPN-TSVD 法能够结合 Trust-TSVD 法和 IPN-TSVD 法的各自优点进行反演,在噪声水平为

0.001~0.01 时,都可以得到符合理论分布的反演结果,能够用于 DLS 反演。

### 4 实验数据反演

由动态光散射颗粒测量系统<sup>[18]</sup>获得实测颗粒相关函数,样品颗粒系为 450 nm 的单峰及 60 nm 与 300 nm 的双峰标准聚苯乙烯乳胶颗粒系,散射角为 90°,实验介质为水,实验温度为 25 °C。分别采用 Trust-TSVD、IPN-TSVD、Trust-IPN-TSVD 三种方法对实验颗粒进行反演,反演结果及反演数据如图 5 及表 4 所示。在反演中,单峰、双峰分布颗粒的反演范围分别为[300,600]、[0,400](单位 nm),两种颗粒反演间隔数及反演初值均为 80、0。

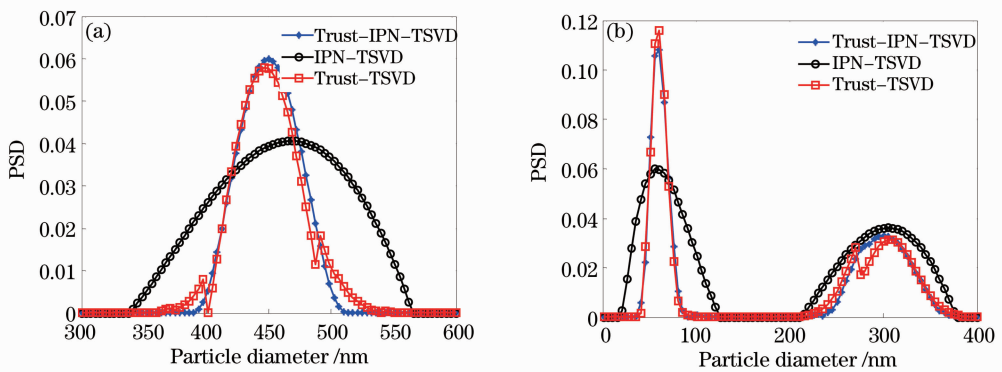


图 5 实测颗粒的反演粒径分布。(a) 450 nm; (b) 60, 300 nm

Fig. 5 Inversion PSD of experimental particles. (a) 450 nm; (b) 60, 300 nm

表 4 实测颗粒的反演数据

Table 4 Inversion data of experimental particles

Method	450 nm		60, 300 nm	
	Peak value /nm	Peak value error /%	Peak value /nm	Peak value error /%
Trust-TSVD	450	0	60.85, 305.23	1.42, 1.74
IPN-TSVD	468.75	4.17	55.86, 305.23	6.90, 1.74
Trust-IPN-TSVD	450	0	60.85, 300.25	1.42, 0.08

由图 5 及表 4 可以看出, Trust-TSVD 法及 Trust-IPN-TSVD 法对单峰分布颗粒反演峰值误差均为 0, 但 Trust-IPN-TSVD 方法的平滑性明显优于 Trust-TSVD 方法。对于双峰分布颗粒, 相对于 Trust-TSVD 方法, Trust-IPN-TSVD 方法的 PSD 平滑性更好、峰值误差可改善 1.66%。对于 IPN-TSVD 方法, 它的反演 PSD 更宽, 峰值误差较大, 而采用了 Trust-IPN-TSVD 方法后, 单峰、双峰分布颗粒反演 PSD 的峰值误差分别可改善 4.17%、5.48%。因此, 从实测颗粒的分析可以得出与模拟数据一致的结论。

## 5 结 论

针对 DLS 的病态反演问题, 考虑 PSD 的非负性及截断奇异值法的抗干扰性, 比较了 Trust-TSVD 及 IPN-TSVD 非负约束法的特性, 并结合两者特性, 提出了一种 Trust-IPN-TSVD 反演方法。该方法继承了 Trust 及 IPN 非负约束截断奇异值方法的优点。通过模拟 200~500 nm 单峰、100~700 nm 双峰分布颗粒三种方法的反演结果可以看出, 相对于 Trust-TSVD 法, Trust-IPN-TSVD 法的反演 PSD 具有较小的峰值误差、相对误差以及较好的平滑性。相对于 IPN-TSVD 法, Trust-IPN-TSVD 法的反演 PSD 同样具有较小的峰值误差、相对误差, 且有较窄的分布宽度。总体而言, Trust-IPN-TSVD 方法的反演 PSD 具有更高的精度及较好的平滑性, 更符合理论分布。最后, 450 nm 单峰及 60 nm 与 200 nm 双峰分布实测颗粒的反演证实了该结论。

## 参 考 文 献

- 1 U. Kätzel, R. Bedrich, M. Stintz *et al.*. Dynamic light scattering for the characterization of polydisperse fractal systems; I. Simulation of the diffusional behavior [J]. *Part. Part. Syst. Charact.*, 2008, **25**(1): 9~18
- 2 Cheng Yanting, Shen Jin, Liu Wei *et al.*. Normalization of autocorrelation function for multiple tau photon correlator [J]. *Chinese J. Lasers*, 2009, **36**(2): 444~448  
成艳亭, 申 晋, 刘 伟 等. 多 tau 光子相关器中自相关函数的归一化方法研究[J]. *中国激光*, 2009, **36**(2): 444~448
- 3 C. Batz-Sohn. Particle sizes of fumed oxides: a new approach using PCS signals [J]. *Part. Part. Syst. Charact.*, 2003, **20**(6): 370~378

- 4 D. E. Koppel. Analysis of macromolecular polydispersity in intensity correlation spectroscopy: the method of cumulants [J]. *J. Chem. Phys.*, 1972, **57**(11): 4814~4820
- 5 S. W. Provencher. CONTIN: a general purpose constrained regularization program for inverting noisy linear algebraic and integral equations [J]. *Comput. Phys. Commun.*, 1982, **27**(3): 229~242
- 6 B. E. Dahneke. Measurement of Suspended Particles by Quasi-Elastic Light Scattering [M]. New York: Wiley Interscience, 1983
- 7 J. G. McWhirter, E. R. Pike. On the numerical inversion of the Laplace transform and similar Fredholm integral equations of the first kind [J]. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 1978, **11**(9): 1729~1745
- 8 I. D. Morrison, E. F. Grabowski. Improved techniques for particle size determination by quasi-elastic light scattering [J]. *Langmuir*, 1985, **1**(4): 496~501
- 9 Yunfei Sun, J. G. Walker. Maximum likelihood data inversion for photon correlation spectroscopy [J]. *Meas. Sci. Technol.*, 2008, **19**(11): 115302
- 10 L. M. Gugliotta, G. S. Stegmayer, L. A. Clementi *et al.*. A neural network model for estimating the particle size distribution of dilute latex from multiangle dynamic light scattering measurements [J]. *Part. Part. Syst. Charact.*, 2009, **26**(1-2): 41~52
- 11 A. R. Roig, J. L. Alessandrini. Particle size distributions from static light scattering with regularized non-negative least squares constraints [J]. *Part. Part. Syst. Charact.*, 2006, **23**(6): 431~437
- 12 T. F. Coleman, Li Yuying. An interior trust region approach for nonlinear minimization subject to bounds [J]. *SIAM J. Optim.*, 1996, **6**(2): 418~445
- 13 Wang Yajing, Shen Jin, Zheng Gang *et al.*. A dynamic light scattering inversion method combining Tikhonov regularization method with multi-grid technique [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2012, **20**(5): 963~971  
王雅静, 申 晋, 郑 刚 等. Tikhonov 正则化与多重网格技术相结合的动态光散射反演[J]. *光学精密工程*, 2012, **20**(5): 963~971
- 14 S. Bellavia, M. Macconi, B. Morini. An interior point Newton-like method for nonnegative least-squares problems with degenerate solution [J]. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 2006, **13**(10): 825~846
- 15 P. C. Hansen. Regularization tools: a Matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems [J]. *Numerical Algorithms*, 1994, **6**(1): 1~35
- 16 P. C. Hansen, D. P. O'Leary. The use of the L-curve in the regularization of discrete ill-posed problems [J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, 1993, **14**(6): 1487~1503
- 17 A. B. Yu, N. Standish. A study of particle size distributions [J]. *Power Technol.*, 1990, **62**(2): 101~118
- 18 Yang Hui, Zheng Gang, Zhang Renjie. Measurement of nanoparticle sizes by variance of temporal coherence of dynamic light scattering [J]. *Optics and Precision Engineering*, 2011, **19**(7): 1546~1551  
杨 晖, 郑 刚, 张仁杰. 用动态光散射时间相干度法测量纳米颗粒粒径[J]. *光学精密工程*, 2011, **19**(7): 1546~1551

栏目编辑: 胡 冰